



TITLE:

B4 液体固体の幾何学的構造(配位相  
転移の研究,基研研究会報告)

AUTHOR(S):

種村, 正美

---

CITATION:

種村, 正美. B4 液体固体の幾何学的構造(配位相転移の研究,基研研究会  
報告). 物性研究 1976, 26(2): B62-B66

ISSUE DATE:

1976-05-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/89159>

RIGHT:

B 3

固体ヘリウムの融解現象

京大理 平 井 章

日本物理学会誌 30 (1975) 540 に平井 章・水崎隆雄「NMR 法による固体ヘリウムの融解現象の研究」が掲載されておりますので御覧下さい。

B 4

液体固体の幾何学的構造

統数研 種 村 正 美

液体や固体の構造を Voronoi 多面体という幾何学的な量で捉えることを以前から行なってきた。ここでは凝固の問題について述べる。前年の研究会で荻田・上田氏らの融解凝固の計算機実験が報告され、我々もこれに対する多面体解析を行なって、この凝固の計算機実験で得られる規則的配列が体心立方格子らしいことを示した。体心立方格子の Voronoi 多面体は四角形 6 個、六角形 8 個の十四面体である。 $n$  面体の  $i$  角形の個数  $n_i$  の組  $n_3 n_4 n_5 n_6 \cdots$  ( $\sum_i n_i = n$ ) で表わせば、上の多面体は 0608 多面体である。凝固の計算機実験の融析の結果、この 0608 多面体が次第に圧倒的多数を占めるようになることから BCC 構造に近いと判断したのであった。そこで今回、この多面体が凝固の途中でどのように空間分布しているかを調べた。そして 0608 多面体の一つの稜（四角形 2 つを結ぶ稜）を図 1 のように置換して得られる 0446 多面体についても調べた。即ち 0608 と 0446 とは位相幾何学的に近いと考えられるからである。図 2 には実験の圧縮率  $PV/NkT$  と時間とのグラフがあり、解析した時間を矢印で示す。図 3, 4 にはそれぞれ time step 3000 及び 4100 における 0608 多面体と 0446 多面体の空間分布が示されている。実線円が 0608 多面体となる粒子、破線円は 0446 となる粒子を示し、実線分は 0608 が互いに隣接しているときに描かれ、破線分は多面体 0608 と 0446 とが隣接しているときに描かれている。3000 step では 0608 はほぼ 1 つにかたまり、

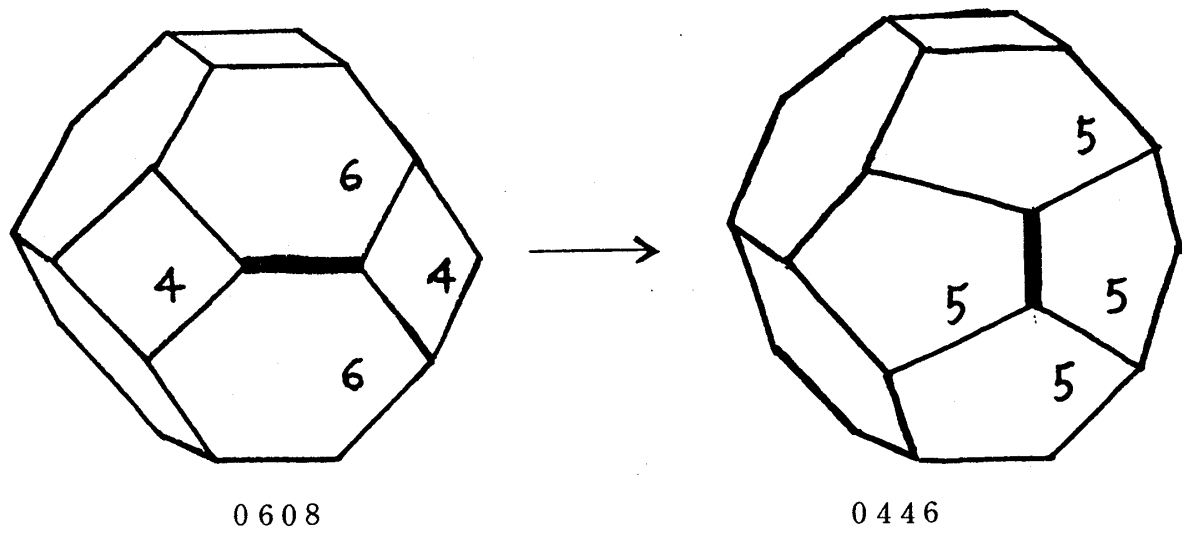


図 1

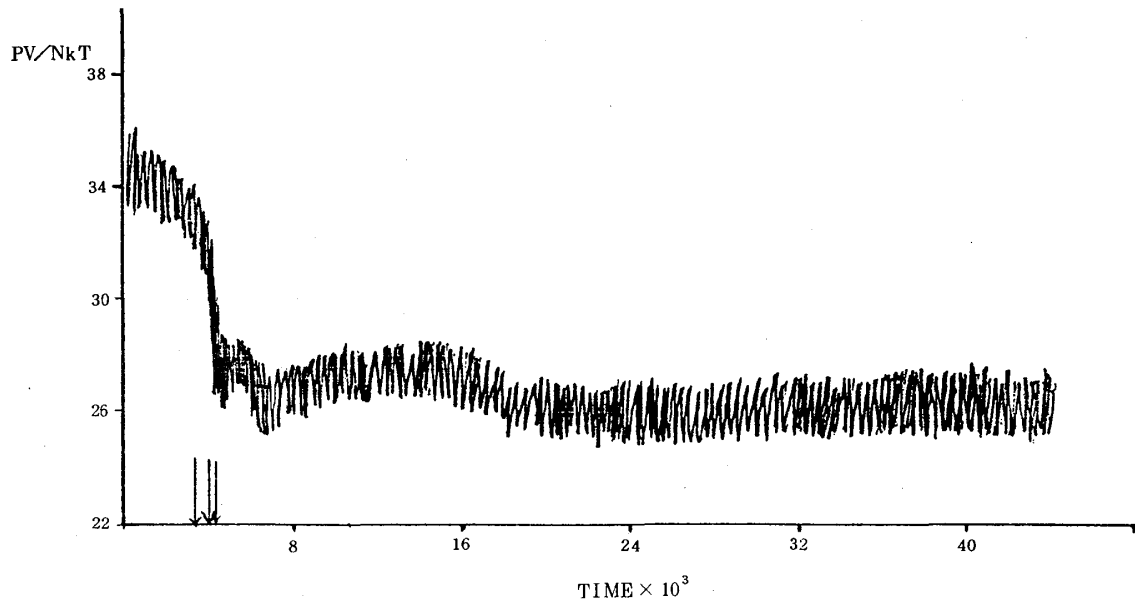
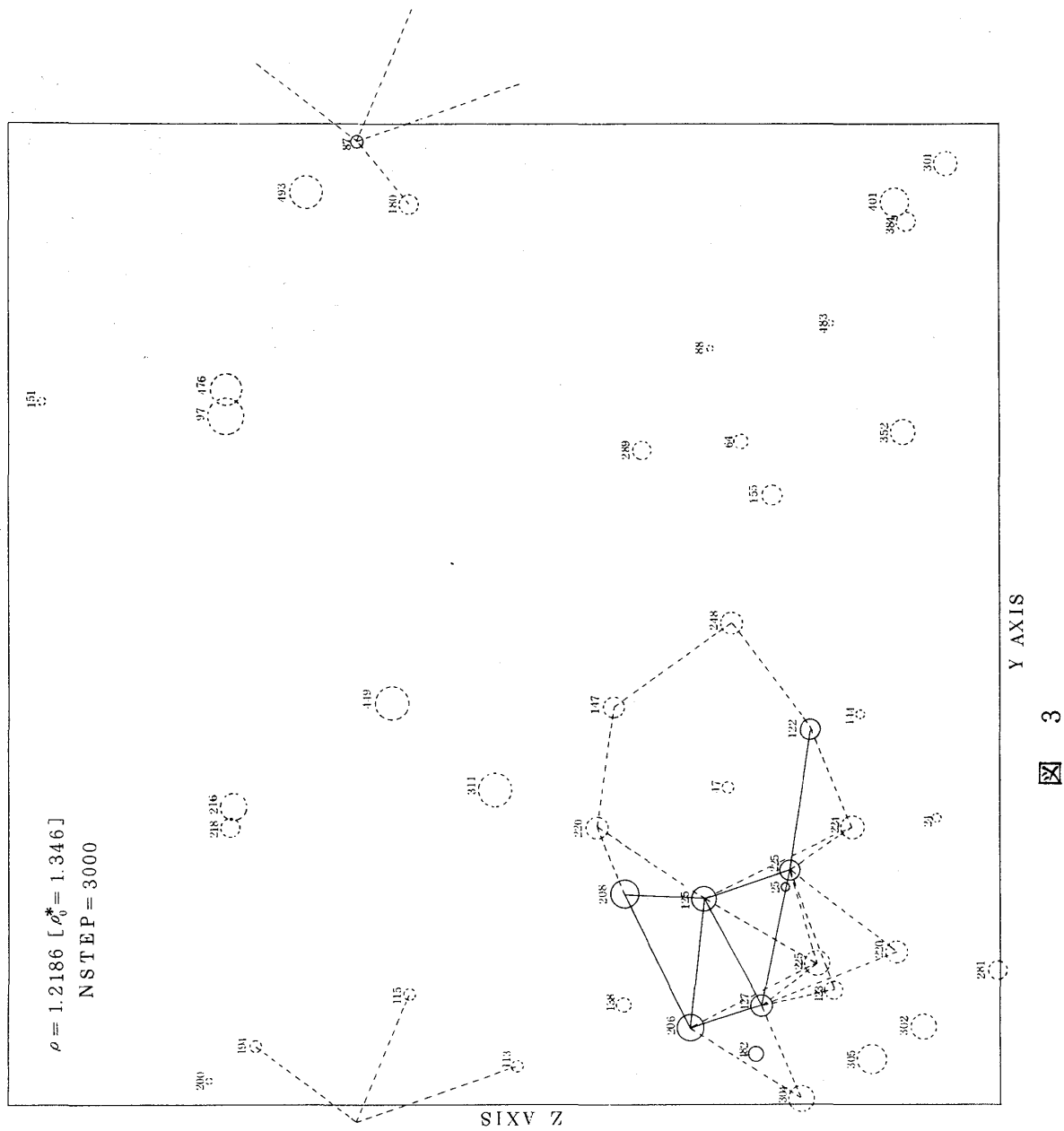
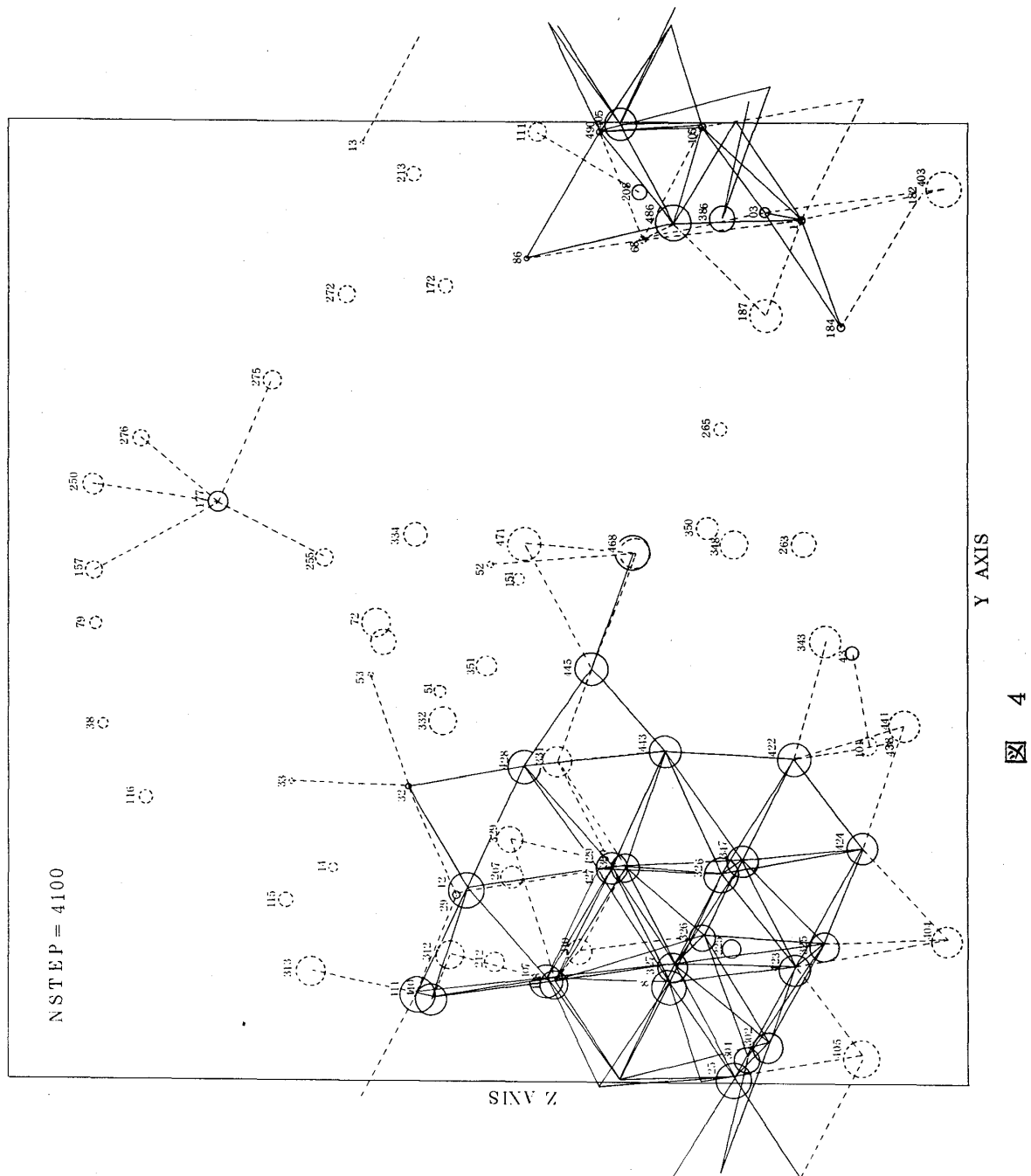


図 2





そのまわりを 0446 がとりかこんでちょうど“結晶核”らしきものができている。4100 step ではこれがもっと成長して、中では規則的に並んでいる。図 4 で“核”が分離しているように見えるのは周期境界条件のためである。これらの time step は圧力が急激に下がり出す時間領域にあたっており、この時間領域に“結晶核”が急激に成長していると考えられる。

結晶への凝固の過程を上のような捉え方で行くと、他の方法では見られない特徴が明確になる。0608 多面体は四角形面が BCC 格子の軸に対応しているので、“結晶核”の向きなどの判定が可能であり、これは今後の課題である。

## B 5

### 高密度液体の free volume 解析

#### —— Soft core system ——

京大・工 市 村 孝 雄

古典液体のセル理論では、周期的平均分子場中での 1 粒子分配関数  $Q_1$  の積で分配関数  $Q_N$  を近似する。もし平均分子場の代りに、代表的な液体構造のもとで各粒子の  $Q_1$  を求め、それらの積で  $Q_N$  を評価するならば、それを代表構造のアンサンブルについて平均することによって  $Q_N$  のよりよい近似評価ができると考えられる。そこで我々は、液体の代表構造として molecular dynamics による計算機実験で作成された配位のデータを用い、全粒子の  $Q_1$  とその分布、平均、密度依存性を調べ、 $Q_N$  を評価した。用いたデータは、500 粒子の soft core system で行われた実験結果で、表 1 に示す 6 個の状態についてのものである。

[I] free volume : 定義, 計算法, 分布

計算機実験から pick up した平衡状態にある  $N$  粒子の配位  $\{R^\alpha\}$  について、 $i$  番粒子の current free volume  $V_{fi}$  を次式で定義する。

$$V_{fi} = \int_{\omega} f_i(r) dr \quad (1)$$